УДК 550.3+519.612

А. І. Якимчик, О. А. Чорна

Про узагальнення одного методу розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь на випадок несиметричних матриць, що мають місце в задачах геофізики

(Представлено академіком НАН України В. І. Старостенком)

Будемо розглядати дійсну несиметричну матрицю A, що діє в n–мірному евклідовому просторі $R^{(n)}$. Суть методу біортогоналізації полягає в тому, що при вдалому виборі початкових векторів u_1 і v_1 будується не одна, як у методах мінімальних ітерацій К. Ланцоша чи A–мінімальних ітерацій, розглянутих в [1], а дві послідовності $\{u_i\}$ і $\{v_i\}$ взаємоспряжених векторів u_i і v_i, $i=1,2,\dots,n,$ кожна з яких знаходиться в біортогональному відношенні з однією з оболонок $L\,(v_1, A^* v_1, \dots, (A^*)^k v_1)$, $L\,(u_1, Au_1, \dots, A^k u_1)$, $k=1,2,\dots,n-1$.[1]

Розгляд двох замість однієї спряжених послідовностей векторів обумовлений відомим з аналітичної геометрії фактом. Всі прості співвідношення між координатами векторів (у вигляді скалярних добутків), заданих в прямокутній системі, можна зберегти при переході до косокутної системи, якщо кожний вектор представити в двоїстому базисі двома системами взаємоспряжених координат (які в прямокутній системі між собою співпадають). Задаючи вектори — послідовні ітерації вектора несиметричною матрицею — в двоїстому базисі $\{u_i\}$ і $\{v_i\}$, можемо отримати таку ж просту по структурі матрицю B, як і у випадку ітерацій симетричною матрицею [1].

Дійсно, вибудовуючи дві послідовності векторів за тричленними формулами вигляду

$$u_{k+1} = -\alpha_{k,k-1} u_{k-1} - \alpha_{kk} u_k + Au_k, \qquad v_{k+1} = -\beta_{k,k-1} v_{k-1} - \beta_{kk} v_k + A^* v_k, \quad k=2,3,\dots,n,$$
$$u_2 = -\alpha_{11} u_1 + Au_1, \qquad v_2 = -\beta_{11} v_1 + A^* v_1 \tag{1}$$

і визначаючи коефіцієнти α_{ij} і β_{ij} з умов біортогональності векторів u_i і v_i, $i=1,2,\dots,n,$ одержуємо

$$\alpha_{kk} = \frac{(Au_k, v_k)}{(u_k, v_k)} = \frac{(u_k, A^* v_k)}{(u_k, v_k)} = \beta_{kk}\,. \tag{2}$$

Щодо коефіцієнтів $\alpha_{k,k-1} = \dfrac{(Au_k, v_{k-1})}{(u_{k-1}, v_{k-1})}$ *і* $\beta_{k,k-1} = \dfrac{(A^* v_k, u_{k-1})}{(u_{k-1}, v_{k-1})}$, вони рівні між собою, що витікає з такого ланцюжка рівностей:

$$(Au_k, v_{k-1}) = (u_k, A^* v_{k-1}) = (-\alpha_{k-1,k-2} u_{k-2} - \alpha_{k-1,k-1} u_{k-1} + Au_{k-1}, v_k + \beta_{k-1,k-2} v_{k-2} + \beta_{k-1,k-1} v_{k-1}) =$$
$$= \alpha_{k-1,k-2} \beta_{k-1,k-2} (u_{k-2}, v_{k-2}) - \alpha_{k-1,k-1} \beta_{k-1,k-1} (u_{k-1}, v_{k-1}) + (Au_{k-1}, v_k) + \beta_{k-1,k-2} (Au_{k-1}, v_{k-2}) +$$
$$+ \beta_{k-1,k-1} (Au_{k-1}, v_{k-1}) = (Au_{k-1}, v_k) = (A^* v_k, u_{k-1})\,.$$

Оскільки $(A^* v_k, u_{k-1}) = (Au_k, v_{k-1}) = (u_k, A^* v_{k-1}) = (u_k, v_k + \beta_{k-1,k-2} v_{k-2} + \beta_{k-1,k-1} v_{k-1}) = (u_k, v_k)$, то, вибираючи орієнтування векторів біортогонального базису так, що $(u_k, v_k) > 0$ для будь-яких $k=1,2,\dots,n,$ маємо

$$\beta_{k,k-1} \equiv \alpha_{k,k-1} = \frac{(u_k, v_k)}{(u_{k-1}, v_{k-1})} > 0, \qquad k=2,3,\dots,n. \tag{3}$$

Так, для визначення у формулах (2) і (3) координат $b_{k,k-1}$, b_{kk} векторів – ітерацій в біортогональному базисі $\{u_i\}$, $\{v_i\}$ слід вирахувати послідовно скалярні добутки (u_{k-1}, v_{k-1}), (u_k, v_k) і $(u_k, A^* v_k) = (Au_k, v_k)$ для $k=1,2,\dots,n$ (при $k=1$ перший скалярний добуток не обчислюється).

Самі вектори u_{k+1} і v_{k+1}, $k=1,2,\dots,n,$ знаходяться за рекурентними співвідношеннями (1). Процес обчислень обривається, якщо при деякому значенні $k=k_0$ одержуємо $(u_{k_0}, v_{k_0}) = 0$. Вважаємо, якщо $k_0 = n+1$, то процес обчислень триває нормально, якщо $k_0 < n+1$, процес вироджується. Є кілька випадків виродження:

a) $u_{k_0} = v_{k_0} = 0$ (двосторонній обрив); $u_{k_0} = 0$, $v_{k_0} \neq 0$ (односторонній обрив);

b) $u_{k_0} \neq 0$, $v_{k_0} = 0$ (односторонній обрив); $u_{k_0} \neq 0$, $v_{k_0} \neq 0$, але $(u_{k_0}, v_{k_0}) = 0$ (тупиковий обрив).

Односторонні і тупиковий обриви процесу обчислень являються винятковими і їх можна уникнути за допомогою належного вибору початкових векторів u_1 і v_1. Двосторонній обрив аналогічний достроковому припиненню обчислень в інших методах, причини яких обговорюються в другій частині статті [1].

Виходячи з виразів (1) — (3), можемо записати

$$Au_1 = \beta_{11} u_1 + u_2, \quad Au_2 = \beta_{21} u_1 + \beta_{22} u_2 + u_3$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots \tag{4}$$

---

[1] Зірочкою позначена операція транспонування матриці.

$$Au_{n-1}=\beta_{n-1,n-2}u_{n-2}+\beta_{n-1,n-1}u_{n-1}+u_n,\ Au_n=\beta_{n,n-1}u_{n-1}+\beta_{nn}u_n$$

для векторів з оболонки $L\,(u_1, Au_1, \dots, A^{n-1}u_1)$ і

$$A^*v_1=\beta_{11}v_1+v_2,\ A^*v_2=\beta_{21}v_1+\beta_{22}v_2+v_3$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots\dots \tag{5}$$
$$A^*v_{n-1}=\beta_{n-1,n-2}v_{n-2}+\beta_{n-1,n-1}v_{n-1}+v_n,\ A^*v_n=\beta_{n,n-1}v_{n-1}+\beta_{nn}v_n$$

для векторів з оболонки $L\,(v_1, A^*v_1, \dots, (A^*)^{n-1}v_1)$.

Введемо позначення:

$[u_1, u_2, \dots, u_n]=U$, $[Au_1, Au_2, \dots, Au_n]=AU$, $[v_1, v_2, \dots, v_n]=V$, $[A^*v_1, A^*v_2, \dots, A^*v_n]=A^*V$, де

$$B^*=\begin{bmatrix} \beta_{11} & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{21} & \beta_{22} & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{32} & \beta_{33} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \beta_{n-1,n-2} & \beta_{n-1,n-1} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \beta_{n,n-1} & \beta_{nn} \end{bmatrix}.$$

Тоді співвідношення (4) і (5) можна записати так: $AU=UB$, $A^*V=VB$. Анулюючий матрицю B поліном $\varphi_n(t)$ будується за тричленними рекурентними формулами відповідно до схем (4) і (5).

Наявність даних, які отримуються за допомогою методів, описаних в [1], дозволяє знаходити розв'язки систем лінійних рівнянь

$$Ax=b,\ \ A\colon R^{(n)}\to R^{(n)};\quad x,b\in R^{(n)}, \tag{6}$$

до яких зводяться багато задач геофізики. Дійсно, здійснимо перетворення

$$\xi=U^*x, \tag{7}$$

де $U=[u_1, u_2, \dots, u_n]$ – ортогональна матриця, складена з вектор-стовпців u_i, $i=1,2,\dots,n$, отриманих реалізацією або методу ортогональних ітерацій, або методу мінімальних ітерацій. Помножимо рівняння (6) зліва на матрицю U^* і з врахуванням рівності $AU=UB$, а також підстановки (7) отримаємо

$$B\xi=U^*b. \tag{8}$$

Система (8) простіша початкової (6). Особливо ця простота проявляється у випадку симетричної матриці A – тоді матриця B буде тридіагональною. В останньому випадку систему (8) можна розв'язати за допомогою витонченого прийому [2], котрий можна розповсюдити на системи з несиметричною матрицею. Опису такого узагальнення немає в роботах [2-7]. Він може бути важливим для застосування, тому наведемо його.

Теорема. *Якщо початкові вектори* u_1 *і* $v_1=Av_0$, $u_1, v_1, v_0\in R^{(n)}$, *і структура невиродженої несиметричної матриці* $A\colon R^{(n)}\to R^{(n)}$ *такі, що забезпечують нормальний перебіг процесу обчислень за рекурентними формулами*

$$u_k=Au_{k-1}-\beta_{k-1,k-1}u_{k-1}-\beta_{k-1,k-2}u_{k-2},\quad v_k=A^*v_{k-1}-\beta_{k-1,k-1}v_{k-1}-\beta_{k-1,k-2}v_{k-2},\quad k=2,3,\dots,n,$$
$$u_2=Au_1-\beta_{11}u_1,\quad v_2=A^*v_1-\beta_{11}v_1$$

векторів двоїстого базису $\{u_i\}$, $\{v_i\}$ *в* $R^{(n)}$, *де*

$$\beta_{kk}=\frac{(Au_k, v_k)}{(u_k, v_k)},\quad k=1,2,\dots,n,\qquad \beta_{k,k-1}=\frac{(u_k, v_k)}{(u_{k-1}, v_{k-1})},\quad k=2,3,\dots,n,$$

то розв'язок системи лінійних рівнянь $Ax=b$, *який будемо шукати у вигляді* $x=\sum_{i=1}^{n}\xi_{0i}u_i$, *може бути отриманий за* n *послідовних кроків наближень за схемою*

$$x^{(1)}=\frac{(b, v_0)}{(u_1, v_1)}u_1,\ x^{(k+1)}=x^{(k)}+\frac{(r_k, v_{k-1})}{(u_k, v_k)}u_k,\ r_k=b-Ax^{(k)},\ x^{(k)}=\sum_{i=1}^{k-1}\xi_{ki}u_i,\ k=2,3,\dots,n.$$

Доведення теореми витікає з наступних несуперечливих міркувань. Оскільки справедливі вирази

$$(x, v_k)=\sum_{i=1}^{n}\xi_{0i}(u_i, v_k)=\xi_{0k}(u_k, v_k),\quad k=1,2,\dots,n,\ (x^{(k)}, v_k)=\sum_{i=1}^{k-1}\xi_{ki}(u_i, v_k)\equiv 0,\quad k=2,3,\dots,n,$$

то вектор $x-x^{(k)}$ задовольняє умовам $x-x^{(k)}\in L(u_k, u_{k+1}, \dots, u_n)\perp L(v_1, v_2, \dots, v_{k-1})$. Тому для k–ої компоненти вектора – розв'язку x в базисі $\{u_i\}$ можна записати

$$\xi_k(u_k, v_k) = (x - x^{(k)}, v_k) = (x - x^{(k)}, A^* v_{k-1} - \beta_{k-1,k-1} v_{k-1} - \beta_{k-1,k-2} v_{k-2}) =$$
$$= (x - x^{(k)}, A^* v_{k-1}) = (r_k, v_{k-1}), \quad k = 2, 3, \ldots, n,$$

де $r_k = Ax - Ax^{(k)} = b - Ax^{(k)}$. Звідси одержуємо, що $\xi_k = \dfrac{(r_k, v_{k-1})}{(u_k, v_k)}, \quad k = 2, 3, \ldots, n$. Отже,

$$x^{(k+1)} - x^{(k)} = \xi_k u_k = \frac{(r_k, v_{k-1})}{(u_k, v_k)} u_k, \tag{9}$$

що з врахуванням визначення 1-го наближення $x^{(1)}$ у відповідності з вибором початкового вектора $v_1 = A v_0$ доводить теорему. Нев'язку вектора $x^{(k)}$ можна вираховувати рекурентно за формулою

$$r_{k+1} = r_k - \frac{(r_k, v_{k-1})}{(u_k, v_k)} A u_k,$$

яка виводиться елементарно з посиланням на (9):

$$r_{k+1} = b - A x^{(k+1)} = b - A x^{(k)} - A(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = r_k - \frac{(r_k, v_{k-1})}{(u_k, v_k)} A u_k, \quad k = 2, 3, \ldots, n+1.$$

Література

1. *Черная О. А., Якимчик А. И.* О процессах доортогонализации некоторых семейств векторов, возникающих при построении характеристических полиномов матриц и используемых при решении систем линейных алгебраических уравнений. 1–2 // Геофиз. журн. – 2005. – **27**, № 3. – С. 503–511; — № 5. – С. 790–805.
2. *Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н.* Вычислительные методы линейной алгебры. – М. – Л.: Физматгиз, 1963. – 734 с.
3. *Березин И. С., Жидков Н. П.* Методы вычислений. Т. 2. – М.: Физматгиз, 1960. – 620 с.
4. *Воеводин В. В.* Вычислительные основы линейной алгебры. – М.: Наука, 1977. – 304 с.
5. *Годунов С. К.* Решение систем линейных уравнений. – Новосибирск: Наука, 1980. – 177 с.
6. *Ланцош К.* Практические методы прикладного анализа. – М.: Физматгиз, 1961. – 524 с.
7. *Уилкинсон Дж. Х.* Алгебраическая проблема собственных значений. – М.: Наука, 1970. – 564 с.

Інститут геофізики ім. С. І. Субботіна НАН України, Київ

Надійшло до редакції 14.12.2005